

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0215U004348

Державний реєстраційний номер: 0109U008220

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 05-03-2015

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 5

Назва етапу: Пошук шляхів практичного використання стабільних карбенів, карбенових аддуктів та продуктів їх перетворень

Початок етапу: 01.2014

Закінчення етапу: 12.2014

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії ім. Л.М.Литвиненка

Код за ЄДРПОУ: 05420735

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 5599800, 5599800

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442396594, 380442343243

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1008.2

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Стабільні карбени і їх металічні комплекси в синтезі гетероциклічних сполук і каталізі органічних реакцій

Назва роботи англійською:

Stable carbenes and their metal complexes in heterocyclic synthesis and catalysis of organic reactions

Реферат українською:

Об'єкт дослідження - синтез стерично екранованих арильних похідних імідазол-2-іліденів та 1,2,4-триазол-5-іліденів та їх комплексів паладію, синтез похідних на основі стабільних карбенів, каталітична ефективність в реакції гідродегалогенування галогенаренів. Мета роботи - синтез стерично екранованих арильних похідних імідазол-2-іліденів та 1,2,4-триазол-5-іліденів та їх комплексів паладію, вивчення структури та каталітичної ефективності комплексів в реакції гідродегалогенування галогенаренів, перетворень 1,2,4-триазол-5-іліденів з електрофілами. Методи дослідження - синтетичний, кінетичний, спектральні (ЯМР спектроскопія), аналітичні (хроматографічний, елементний аналіз), квантовохімічні, метод Х-променевої дифракції в кристалах. Основні результати. Синтезовано стерично екрановані арильні похідні імідазол-2-іліденів та 1,2,4-триазол-5-іліденів та сольові комплекси паладію на їх основі. Встановлено мономерний характер комплексів паладію імідазол-2-іліденів з розгалуженими арильними замісниками та димерний (біядерний) характер комплексів з 2,6-діізопропілфенільними (dipp) замісниками. Виявлено високий каталітичний ефект стерично екранованих комплексів з розгалуженими арильними замісниками по відношенню до dipp-заміщених та стерично відкритих. Шляхом реакції 1,2,4-триазол-5-іліденів з фенілізотіоціанатом та диметилловим естером ацетилендикарбонової кислоти синтезовано стабільну спіроциклічну сполуку - похідну 1,2,4-триазоло-спіро-піролінтіону. Знайдено нове перетворення 4-броманіліну при алкілуванні його бензгідролом в кислому середовищі, що, внаслідок заміни бромового на алкіл, дає 2,4,6-трибензгідріланілін. Отримані дані мають значення для препаративного синтезу стабільних карбенів, карбенових комплексів перехідних металів - каталізаторів органічних реакцій та для гетероциклічного синтезу. Галузь застосування - каталіз органічних реакцій, синтез карбенів та карбенових комплексів перехідних металів, синтез гетероциклічних сполук на основі карбенів.

Реферат англійською:

Object of the study is the synthesis of sterically shielded aryl substituted of imidazol-2-ylidenes and 1,2,4-triazol-5-ylidenes and their palladium complexes, synthesis of derivatives on the basis of stable carbenes, catalytic efficiency in the reaction of haloarene hydrodehalogenation. The purpose of the work is synthesis of sterically shielded aryl derivatives of imidazol-2-ylidenes and 1,2,4-triazol-5-ylidenes and their palladium complexes study of the structure and catalytic efficiency of complexes in the reaction of haloarene hydrodehalogenation, transformations of 1,2,4-triazol-5-ylidenes with electrophiles. Methods of the research are synthetic, kinetic, spectral (NMR spectroscopy), analytical, chromatographical, elemental analysis, quantum chemical, X-ray diffraction study. Basic results. Sterically shielded aryl substituted imidazol-2-ylidenes and 1,2,4-triazol-5-ylidenes and salt palladium complexes on their basis have been synthesized. A monomeric character of palladium complexes of imidazol-2-ylidenes with branched aryl substituents and a dimeric (binuclear) character of complexes with 2,6-diisopropylphenyl (dipp) substituents have been established. The high catalytic effect of sterically shielded complexes with branched aryl substituents relative to dipp-substituted and sterically open. A stable spirocyclic compound a derivative of 1,2,4-triazolo-spiro-pyrrolinethione was synthesized by the reaction of 1,2,4-triazol-5-ylidene with phenylisothiocyanate and dimethyl acetylene dicarboxylate. A new transformation of 4-bromoaniline was found under the alkylation by benzhydryle in the acidic medium that as a result of substitution of bromine to benzhydryl gives 2,4,6-trisbenzhydrylaniline. The data obtained have significance for the preparative synthesis of stable carbenes, transition metal carbene complexes as catalysts of organic reactions and for the heterocyclic

synthesis. Scope of application – catalysis of organic reactions, synthesis of carbenes and transition metal carbene complexes, heterocyclic synthesis on the basis of carbenes.

Індекс УДК: 547.7/.8, 547.78+547.79

Коди тематичних рубрик: 31.21.27

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Короткіх Микола Іванович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Методи синтезу карбенових комплексів перехідних металів зі стерично ускладненою структурою

Назва НТП англійською: Methods for the synthesis of transition metal carbene complexes with sterically complicated structure

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: 72.19 – Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розширення методу синтезу карбенових комплексів перехідних металів зі стерично ускладненою структурою на поліядерні похідні.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: не визначено

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: підприємства фармацевтичної галузі промисловості

Перспективні ринки: Україна, країни СНД, можливо, країни Євросоюзу

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 0

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 0

Очікуваний термін окупності (років): не визначено

Додаткова інформація: За договорами

IX. Бібліографічний опис

1. Синтез і антимікробна активність прекарбенових та металокарбенових сполук ряду імідазолу [Текст] / В.Ш. Саберов, К.О. Марічев, М.І. Короткіх, О.П. Швайка, Р.В. Родік, А.Б. Драпайло, Т.М. Пехтерева, О.З. Комаровська-Порохнявець, В.І. Лубенець, В.П. Новіков // ЖОрФХ.- 2014. – Т. 12, № 2 (46).– 36-43; 2. Синтез і антимікробна активність металокарбенових сполук ряду триазолів [Текст] / Н.В. Глиняна, В.Ш. Саберов, А.В. Кнішевицький, М.І. Короткіх, О.П. Швайка, О.С. Папаяніна, О.З. Комаровська-Порохнявець, В.І. Лубенець, В.П.

Новіков // ЖОрФХ.- 2014. - Т. 12, № 2 (46).- Р. 44-52; 3. Syntheses of sterically shielded stable carbenes of the 1,2,4-triazole series and their corresponding palladium complexes: efficient catalysts for chloroarene hydrodechlorination [Text] / N.V.Glinyana, V. Sh. Saberov, N. I. Korotkikh, A. H. Cowley, R.R.Butorac, D.A.Evans, T. M. Pekhtereva, A. F. Popov, O. P. Shvaika // Dalton Trans. - 2014. - Vol. 43.- P. 16227 - 16237; 4. Exceptionally Efficient Catalytic Hydrodechlorination of Persistent Organic Pollutants: Application of New Sterically Shielded Palladium Carbene Complexes [Text] / V. Sh. Saberov, D. A. Evans, N. I. Korotkikh, A. H. Cowley, T. M. Pekhtereva, A. F. Popov, O. P. Shvaika // Dalton Trans. - 2014. - Vol. 43.- P. 18117 - 18122; 5. Стабільні карбени в органічному синтезі [Текст] / Н. І. Коротких, Н. В. Глиняна, Г. Ф. Раєнко, О. П. Швайка // Синтез, свойства и биологическая активность функциональнозамещенных азолов (избранные обзоры) / под ред. В. Броварец, В. Зябрева.- Amsterdam: LAP Lambert Acad. Publ.- 2014.- С. 423-457; 6. Швайка, О.П. Карбенові варіації класичних реакцій [Текст] / О.П. Швайка, М.І. Короткіх // Журн. орган. фарм. хімії. - 2013.- Т. 11, № 4(44).- Р. 3-14; 7. Лящук, С. Н. Направления реакции циклоприсоединения бис(диоксидо-?6-сульфанилиденметана к активированным олефинам [Текст] / С. Н. Лящук, Т. Ф. Дорошенко // Наук. пр. ДонНТУ 2014.- Вип. 1 (22). - С. 134 - 141.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Попов Анатолій Федорович

Перелік осіб-виконавців

Єня Василь Іванович

Глиняна Наталія Валеріївна

Дорошенко Тетяна Федорівна

Кисельов Артем Вікторович

Кнішевицький Артур Володимирович

Ковач Микола Анатолійович

Короткіх Микола Іванович

Лящук Сергій Миколайович

Орлов Максим Артурович

Раєнко Геннадій Федорович

Сабєров Вагіз Шамільович

Швайка Олесь Павлович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**

